

PDF hosted at the Radboud Repository of the Radboud University Nijmegen

The following full text is a publisher's version.

For additional information about this publication click this link.

<http://hdl.handle.net/2066/19404>

Please be advised that this information was generated on 2017-12-05 and may be subject to change.

Meer dan een glazen bol

ORATIE door dr. ir. D. van de Meent



Meer dan een glazen bol

Rede uitgesproken bij de aanvaarding van het ambt van bijzonder hoogleraar in de Milieukwaliteit aan de Faculteit der Natuurwetenschappen, Wiskunde & Informatica, vanwege de Stichting Nijmeegs Universiteitsfonds, aan de Katholieke Universiteit Nijmegen, op vrijdag 6 februari 2004

door dr. ir. D. van de Meent

Vormgeving en opmaak: Nies en Partners bno, Nijmegen

Drukwerk: Thieme MediaCenter Nijmegen

*Meneer de Rector Magnificus,
Zeer gewaardeerde toehoorders,*

Ik werk veel met modellen, nooit met een glazen bol. Ik heb het hier over milieu-modellen: stelsels van wiskundige vergelijkingen waarmee we simuleren hoe menselijke ingrepen de leefomgeving veranderen. Modellen fascineren me. Hoe dat komt? Vermoedelijk vanwege de aha-beleving die ze me geven. Hoe dikwijls is het me niet overkomen dat ik een onwaarschijnlijk lijkende berekeningsuitkomst heb toegeschreven aan een fout in het model, terwijl na enig nadenken bleek dat het model goed, maar mijn redenering fout was? Ik denk dat modellen me helpen de werkelijkheid te structureren. Dat heb ik nodig, want de werkelijkheid is mij te ingewikkeld. Die moet geordend, vereenvoudigd en verklaard. En met modellen lukt dat. Zo werkt het bij mij, en ik vermoed dat velen van u, en vele studenten in de milieunatuurwetenschap op dezelfde manier als ik baat kunnen hebben bij het werken met modellen.

Waarde van modellen

Ik noem u de in mijn ogen belangrijkste waarden van modellen.

Logica

Een goed model is voor mij spiegel der logica. De uitkomsten van modelberekeningen weerspiegelen feilloos de kennis waarmee we het model hebben gevoed – in mijn geval is dat kennis van transport – en omzettingssnelheden van stoffen in het milieu – volgens een ijzeren logica. En daar houd ik van: ijzeren logica. Toen een collega me jaren geleden vroeg hoe het met de kinderen ging, heb ik hem verteld hoe ik me verbaasde over de ijzeren logica die jonge kinderen al kunnen hebben. Mijn trots moet duidelijk geweest zijn. Deze collega, die wat ouder was dan ik, glimlachte en vroeg me: “Verbaast je dat?” Goede modellen lijken in dit opzicht op mijn kinderen: met ijzeren logica tonen ze je de consequentie van wat je als waarheid hebt aangenomen. Als dit, dan dat. Als de theorie waarmee we het model hebben gevoed een goede weergave is van de processen die in de werkelijkheid optreden, dan zouden we het volgende moeten zien gebeuren. Zien we dat niet, dan was misschien de theorie niet goed genoeg. Ik benader mijn vak vanuit de natuur-

ISBN 90-9017886-4

© dr. ir. D. van de Meent, 2004

Niets uit deze uitgave mag vermenigvuldigd en/of openbaar gemaakt worden middels druk, fotokopie, microfilm, geluidsband of op andere wijze dan ook, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de copyrighthouder.

wetenschap. Een milieumodel is voor mij het condensaat van getoetste natuurwetenschappelijke theorieën. Meer dan een glazen bol.

Dat vond Ray Lassiter ook. De manier waarop hij dit twintig jaar geleden formuleerde, is me altijd bijgebleven. Volgens Lassiter verschaffen modellen ons in de eerste plaats inzicht in de wijze waarop theorie 'werkt'¹. Goed gebruik van modellen toont welke theorie een bruikbare beschrijving oplevert van de verschijnselen die we waarnemen en kan ertoe bijdragen ze te begrijpen. Op die manier helpen modellen me de werkelijkheid te ordenen.

Verklaring

Een goed model beschrijft en verklaart wat we waarnemen, zodanig dat het model voorspellende waarde krijgt. De overtuiging die hieronder ligt is dat mechanistisch begrip het enig juiste vertrekpunt is bij het formuleren van voorspellingsmodellen. Wellicht deelt u die overtuiging; misschien ziet u niet eens ruimte voor andere opties. Ik wijs u erop dat het er in de modelleerpraktijk vaak anders aan toe gaat. In die praktijk gebruiken we veel empirische modellen die de waargenomen feiten goed beschrijven, zonder dat ze rusten op een mechanistische basis. Kwantitatieve structuur-activiteitsrelaties, QSARs, zijn vaak van dit type. Bijvoorbeeld de veelgebruikte vergelijking van Sabljic² en anderen, waarmee de evenwichtsverdeling van hydrofobe stoffen tussen water en bodems of sedimenten, K_{SW} , wordt gerelateerd aan de octanol-waterpartitiecoëfficiënt van de stof, K_{OW} , en het organisch koolstofgehalte van bodem of sediment:

$$K_{SW} = 1.26 F_{OC} K_{OW}^{0.81}$$

Deze vergelijking blijkt voor vrijwel het gehele domein van K_{OW} -waarden de gemeten K_{SW} -waarden zo goed te beschrijven dat de vergelijking goed kan worden gebruikt om K_{SW} -waarden te voorspellen als metingen ontbreken. Maar een theorie die uitlegt waarom het verband krom is, en wat de achtergrond is van de waarden 0.81 voor de exponent en 1.26 voor de evenredigheidsconstante, ontbreekt. Feit is dat er veel van dergelijke vergelijkingen zijn gerapporteerd in de literatuur, gemeten met verschillende sets van stoffen en bodems, met als uitkomst verschillende evenredigheidsconstanten en krommingsexponenten. Hoewel de formule van Sabljic een

prima 'fit' geeft, heb ik meer sympathie voor hen die kiezen om het verband tussen K_{SW} en K_{OW} recht evenredig te veronderstellen, zoals Karickhoff³.

$$K_{SW} = 0.41 F_{OC} K_{OW}$$

Met zo'n model kan ik leven. Het zegt dat de neiging van een stof om zich vanuit de waterfase te verplaatsen naar de vaste fase recht evenredig is met de neiging om octanol als verblijfplaats te verkiezen boven water. In welke mate de vaste fase van de bodem minder aantrekkelijk is dan octanol blijkt uit de grootte van de evenredigheidsconstante, waarvan de hoeveelheid organisch materiaal in de bodem deel uitmaakt. Helder, begrijpelijk, en een goede basis voor voorspellingen voor het gedrag van niet gemeten stoffen in niet gemeten bodems.

Toch gebruik ik zelf ook vaak de onbegrepen empirische relatie van Sabljic. Ik ben ingenieur genoeg om te aanvaarden dat een gebleken verband bruikbaar kan zijn om te voorspellen, ook zonder dat we de achtergrond ervan doorgronden.

Voorspelling

De mogelijkheid om te voorspellen is wat ons drijft. De directe waarde van milieumodellen ligt in de toepassing ervan in de praktijk. De praktijk bijvoorbeeld, dat in Europees verband is afgesproken dat vóórdat een nieuwe stof op de markt mag worden gebracht, de producent of importeur bij het bevoegd gezag gegevens over die stof deponeert, die de overheid in staat stellen te beoordelen of er vanuit milieu- of gezondheidsoogpunt bezwaar is tegen het gebruik van die stof. Daarvoor zijn voorspellingsmodellen nodig.

Met plezier kijk ik terug op de jaren dat we voor het ministerie van VROM werkten aan de ontwikkeling van een Beoordelingssysteem voor Nieuwe Stoffen, het BNS, en later aan het Prioriteringssysteem voor Bestaande Stoffen, het PBS, dat zou worden opgevolgd door het Uniforme Beoordelingssysteem voor Stoffen, UBS, dat op zijn beurt geïnternationaliseerd zou worden tot USES, het Uniform System for the Evaluation of Substances, dat werd verheven tot Europees standaardsysteem voor risicobeoordeling van nieuwe en bestaande stoffen EUSES, het European System for the Evaluation of Substances⁴. De Nederlandse en Europese overheid hebben veel geïnvesteerd in wetenschap die moest resulteren in modellen die kunnen voorspellen.

Maar ik heb het stoffenbeoordelingswerk nooit echt gezien als voorspellen. Tenminste niet in de zin van het voorspellen van wat staat te gebeuren. Veel meer in profetische zin; in de zin van: duiding van wat er echt toe doet. Zoals bijvoorbeeld in de folder die we ooit maakten voor het VN milieuprogramma UNEP, om duidelijk te maken hoe milieubeleid op het gebied van persistente organische stoffen, de zogenaamde POPs, kan worden ondersteund met modelberekeningen. Met een model hebben we gesimuleerd hoe concentraties van DDT in bodem reageren op het stoppen van het gebruik in vrijwel de hele wereld. DDT is een heel persistente stof, maar het breekt toch enigszins af. De simulatie gaf aan dat het vrijwel tot nul gereduceerde gebruik op termijn zal leiden tot aanzienlijke afname van de concentraties. Wat ook klopt met metingen. Hetzelfde model toegepast voor lood liet zien hoe anders dat ligt voor een stof waarvan de afbraaksnelheid echt nul is. De profetische waarde van het model is dat het laat zien hoe persistentie ertoe doet. Als we een stof in gebruik nemen, en als het gebruik, en dus ook de emissie ervan naar het milieu min of meer constant is, zullen na enige tijd de concentraties van die stof in lucht, water en bodem ook min of meer constant worden. Voor een stof die makkelijk afbreekt zal dat snel gaan, en zullen de concentraties op een laag niveau stabiliseren. Naarmate een stof langzamer afbreekt, persistenter is, zal het langer duren voordat de toestand stabiliseert, en zal dat – bij dezelfde emissie – gebeuren bij hogere concentraties. Voor stoffen die helemaal niet afbreken, zoals metalen, leidt dit tot de extreme situatie dat bij voortdurend gebruik de concentraties tot in lengte van tijd zullen blijven stijgen, en dat stoppen van het gebruik deze stijging weliswaar tot staan brengt, maar dat daling van de concentraties vrijwel uitblijft. Het model profeteert dat de gevolgen van het emitteren van organische stoffen, hoe ernstig ook, op den duur door de natuur worden uitgewist, maar dat de gevolgen van knoeien met metalen blijvend zijn.

Toetsing

Welke rol spelen metingen in dit wiskundig-rekenkundige voorspellingsgeweld? Hoe kritisch zijn we bij het voeden van onze modellen met kennis? Hoe grondig is die kennis getoetst aan waarnemingen? Begrijpen we goed genoeg hoe de dingen werken om er extrapolerende voorspellingen mee te doen over niet bestaande situaties? Zijn onze modellen gevalideerd? In onvoldoende mate, zo vond mijn

RIVM-collega De Kwaadsteniet, die zijn mening niet onder stoelen of banken stak, en daarmee in conflict kwam met zijn superieuren. 'Meten is weten; modelleren is fantaseren', zo hoor ik nogal eens schimpen. Met genoeg constateer ik dat deze kritiek door het RIVM als opbouwend ter harte is genomen. Ik leg mijn aanstelling aan deze universiteit uit als blijk daarvan.

Maar we kunnen het streven naar validatie ook overdrijven. Hoe precies moet een model de werkelijkheid weergeven? Is een model ooit goed genoeg? George Box formuleerde het treffend toen hij schreef dat alle modellen fout zijn⁵. Modellen zijn vereenvoudigingen van de werkelijkheid; ze wijken er dus per definitie van af. Als ze dat niet deden was er geen voordeel mee te behalen. Ja, alle modellen zijn fout; de praktische vraag is alleen hoe groot de fout is die we onszelf mogen toestaan bij het toepassen van modellen voordat we een model als onbruikbaar moeten verwerpen.

Vereenvoudiging

Met modellen vereenvoudigen we als het ware de werkelijkheid. Dat kan me niet ver genoeg gaan. Als de kern van de werkelijkheid maar behouden blijft. Is dat geen heerlijke manier van fantaseren?

Ik hoorde hoe een landelijke krant zijn messcherpe analyses aanprijst met de zinsnede: 'niet gecompliceerder dan de werkelijkheid zelf'. Ik begrijp niet hoe men ruimte ziet voor andere mogelijkheden. Analyseren en vereenvoudigen tot bevatbare proporties, dat is waarom we modelleren. Van een kwaliteitskrant verwacht ik eigenlijk precies dezelfde benadering van de werkelijkheid. Naar voren halen wat van belang is en weglaten wat er niet toe doet. Alleen zo kan Lassiter modellen hebben gebruikt om inzicht te krijgen in hoe theorie werkt.

Multimedia lotgevallenmodellen: historische ontwikkeling

Ik ga mij in mijn leeropdracht 'milieukwaliteit' in sterke mate richten op modellering van het gedrag en de effecten van chemische stoffen. In het bijzonder zal ik me daarbij toespitsen op het gebruik van de zogenaamde multimedia lotgevallenmodellen. Op SimpleBox^{6,7,8} bijvoorbeeld: dat is zo'n multimedia lotgevallenmodel, dat beschrijft hoe een chemische stof zich gedraagt in een milieu dat is opgebouwd uit de media lucht, water en bodem. Een model van het Mackay-type. Ik gebruik

deze gelegenheid om u de ontwikkeling te schetsen van dit modeltype. Het past bij mijn leeropdracht, en het geeft mij de gelegenheid om accenten te zetten bij wat ik belangrijk vind. Dit mede aan de hand van dingen die ik zelf heb meegemaakt. Toen twintig jaar geleden de Wet Milieugevaarlijke Stoffen, met daarin de meldingsplicht voor nieuwe stoffen, werd voorbereid, riep de verantwoordelijke beleidsmedewerker mijn hulp daarbij in. Hij legde me uit dat de overheid nadat een stof is aangemeld, 45 dagen de tijd heeft om gemotiveerd bezwaar aan te tekenen tegen het op de markt brengen van een stof. Na die periode mag de producent of importeur zijn gang gaan. Zijn vraag was of we een beoordelingssysteem voor hem konden maken: een systeem van modellen waarmee wordt voorspeld welke concentraties we in water, bodem en lucht moeten verwachten als de stof in gebruik wordt genomen en hoe erg dat dan zou kunnen zijn voor de gezondheid van mensen en ecosystemen. Het ging om een systeem voor een nieuwe stof; een stof waarvan we nauwelijks meer weten dan wat zijn octanol-waterpartiticoëfficiënt is. Een stof waarvan op voorhand niet altijd bekend is waar hij zal worden geproduceerd, of hoe hij zal worden gebruikt. Het leek me een onmogelijke opgave en dat heb ik die beleidsmedewerker ook gezegd. Hij was daar niet blij mee. Veel later heb ik van mijn chef begrepen dat dit vooral kwam door mijn ondiplomatieke verwoording, met verwijzing naar het gezegde dat één gek meer kan vragen dan duizend wijzen kunnen antwoorden. Ik moest terug: mij werd duidelijk gemaakt dat de overheid geen andere keuze had dan binnen 45 dagen te antwoorden en dat men dat naar beste kunnen zou gaan doen, mét of zonder mijn hulp. Als mij dat te min was, mocht ik terug naar mijn ivoren toren der wetenschap en dan zou hij zijn oordeel vormen uit wat hij wél beschikbaar had, desnoods met een glazen bol, maar hoe dan ook binnen 45 dagen. Ik heb toen de keuze gemaakt om naar mijn beste wetenschappelijke kunnen bij te dragen aan zorgvuldige onderbouwing van de beslissingen die moeten worden genomen.

Mijn kennismaking met de wereld van multimedia lotgevallenmodellering volgde kort daarop. Mijn collega Jodi de Greef en ik oriënteerden ons op modellen waarmee de schade kon worden voorspeld die een nieuwe stof zou kunnen aanrichten in het milieu. Van meet af aan was duidelijk dat multimedia lotgevallenmodellering een belangrijke rol zou spelen. Want twintig jaar na de publicatie van *Silent Spring*⁹ kenden we natuurlijk allemaal de voorbeelden van persistente organische

gifstoffen waarvan de schadelijke invloed op mens en milieu pas enige tijd later zichtbaar werd. Een schadelijke invloed, die niet beperkt bleef tot de plaats waar de stoffen waren gebruikt, en die kon optreden in andere milieucompartmenten dan die waarnaar ze waren uitgestoten. Doel van de aanmelding en beoordeling van nieuwe stoffen was immers om te voorkomen dat meer stoffen met een dergelijk gedrag op de markt zouden komen. Multimedia lotgevallenmodellen zijn voor dit doel ontworpen in Noord-Amerika, waar veel dingen tien jaar eerder gebeuren dan bij ons. De Greef en ik ondernamen een vierweekse studiereis naar de VS en Canada, om de kunst daar te gaan afkijken. Een buitengewone ervaring waarvan ik veel heb geleerd. Ik heb bijvoorbeeld geleerd ik niet vier weken zonder mijn vrouw en kinderen kan. Maar vooral heb ik de bagage opgedaan voor het vervolg van mijn loopbaan als beleidsondersteuner. Ik heb kennis gemaakt met modellen, met werkwijzen en met zienswijzen. En met de mensen erachter.

Evaluatiemodellen

Ik heb er bijvoorbeeld het principe van de relatieve beoordeling geleerd. Belangrijker dan het in absolute zin correct voorspellen van de concentraties in lucht, water en bodem, is het om vergelijkenderwijs goed te voorspellen van welke stoffen de grootste schadelijke effecten moeten worden verwacht. George Baughmann en zijn medewerkers bij het Environmental Research Laboratory van het USEPA in Athens, Georgia onderkenden dit. Zij begonnen rond 1975 voor dit doel de zogenaamde generieke evaluatiemodellen voor milieugedrag van stoffen te ontwikkelen. De modellen die zij schreven, deelden twee hoofdkenmerken. In de eerste plaats werd niet een werkelijke milieusituatie gesimuleerd, maar een hypothetische modelwereld, waarin de voor het verspreidingsgedrag van stoffen essentieel geachte transport- en omzettingroutes goed vertegenwoordigd waren. In de tweede plaats werden processnelheden gemodelleerd als functies van de eigenschappen van de te modelleren stoffen, wat tot dan toe niet erg gebruikelijk was. Dat stoffen zich in verschillende mate hechten aan bodem werd gemodelleerd met stofspectifieke bodem-waterpartiticoëfficiënten, waarvan de waarde bekend was uit waarnemingen. Voor Baughmann en zijn mensen was dat niet goed genoeg. De fysisch-chemicus Karickhoff ontdekte dat bodem-waterpartiticoëfficiënten van stoffen bij benadering evenredig zijn met octanol-waterpartiticoëfficiënten. De beroemde

relatie van Karickhoff heeft u al gezien. De evaluatiemodellen uit de Athens-school maakten maximaal gebruik van dit type kennis. Zo kon zichtbaar worden gemaakt hoe dampdruk, wateroplosbaarheid en reactiviteit in bodem en water hun uitwerking hebben op het gedrag van een stof in het milieu. Zo kon ook worden begrepen waarom de ene stof zich anders gedraagt dan de andere. En zo kon worden voorspeld met welke stof men voorzichtig zou moeten zijn. Zo formuleerde Larry Burns het Exposure Analysis Modeling System EXAMS¹⁰, en schreef Bob Carsel het Pesticide Root Zone Model PRZM¹¹: modellen die niet in de eerste plaats waren bedoeld om te voorspellen welke concentraties in een werkelijke milieusituatie optreden, maar op basis waarvan inzichtelijk werd hoe en waarom stoffen verschillen in hun milieugedrag.

Lucht-water-bodemmodellen

Het concept van het generieke evaluatiemodel is verder uitgewerkt door Neely bij Dow Chemical in Midland, Michigan en door Mackay aan de Universiteit van Toronto in Canada. Zij ontwikkelden omstreeks 1980 wat nu bekend is als het multimedia lotgevallenmodel^{12,13}, waarin de nadruk valt op de neiging van stoffen om zich te bewegen tussen de milieucompartmenten lucht, water en bodem. Het wereldbeeld van Neely en Mackay, 'unit world', zoals zij het noemden, was kinderlijk eenvoudig. Nadat een stof naar het milieu is uitgeworpen, verdeelt deze zich over de verschillende milieumedia die worden gemodelleerd als een handvol gemengde dozen. Voor elke doos wordt een massabalansvergelijking geschreven en voilà: een model van zeer beperkte omvang dat zich rechtstreeks in een spreadsheet laat coderen. Een beetje gevorderde bachelor brengt dit zonder al te veel moeite tot een goed einde. En dat is trouwens precies hoe het eerste model van Mackay is geprogrammeerd: door zijn kinderen. In dat opzicht is er niets nieuws onder de zon. Als het echt moeilijk wordt, vragen we onze kinderen om hulp. Wat mij aanspreekt in het concept van Neely en Mackay is dat het een holistische beschrijving biedt van de gevolgen van het gebruik van een stof voor het totale milieu, zonder te ontaarden in een model bijna zo gecompliceerd als de werkelijkheid zelf. De kracht van het modelconcept is dat het totale wereldmilieu wordt behandeld als een gesloten systeem. De totaal geëmitteerde hoeveelheid op wereldschaal wordt verantwoord; geen molecuul ontsnapt aan de milieuchemische boek-

houding. Voor elk molecuul zijn er maar twee mogelijkheden: het wordt afgebroken, of het wordt toegevoegd aan de voorraad in het milieu; meer smaken zijn er niet. Een in water geloosde stof kan ontsnappen naar de atmosfeer, maar hij ontsnapt daarmee niet aan onze aandacht. Dit in tegenstelling tot open modellen, waar de sluitpost altijd het grensoverschrijdende transport is, waarvan het relatieve belang groter is naarmate het systeem waarnaar we kijken een kleiner deel van het geheel is. Wij kijken nu eenmaal graag naar ons eigen land -en dan ontsnappen er nogal wat moleculen naar het buitenland. Of ze komen er juist vandaan. In beide gevallen treft ons de beperking van het open model.

Toegegeven, die holistische eenvoud heeft zijn tol. In de gesloten 'unit world' is de ruimtelijkheid tot nul gereduceerd. Het model kan niet beschrijven hoe concentraties van plaats tot plaats verschillen. Het behandelt lucht, water en bodem als gemengde bakken. Daarmee wordt de werkelijkheid tamelijk wat geweld aangedaan. Wie daarmee niet kan leven moet dit type model niet gebruiken.

Fugaciteitsmodellen

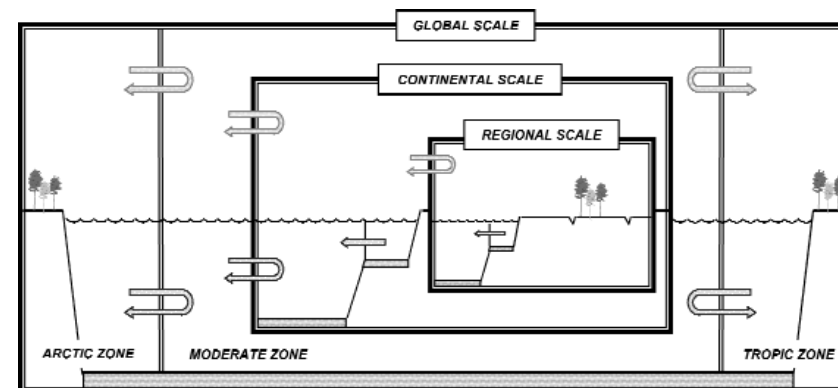
Zonder de bijdragen van anderen te kort te doen wil ik de bekendheid van multimedia lotgevallenmodellen geheel toeschrijven aan de Schots-Canadese chemisch technoloog Donald Mackay. In zijn baanbrekende publicaties, en in zijn inspirerende lezingen leerde hij zijn studenten en de rest van de wereld, hoe bij multimedia lotgevallenmodellen inzicht gepaard gaat met eenvoud. Hij heeft me volledig overtuigd, zoals u al hebt gemerkt. Fugaciteitsmodellen, noemde hij zijn lucht-water-bodemdoosmodellen. De rest van de wereld gebruikte doorgaans de term 'Mackay-model'. Wie Mackay kent weet dat het ondenkbaar is dat hijzelf ooit dit woord in de mond zou nemen. Mackay noemde zijn modellen fugaciteitsmodellen, omdat hij bij het formuleren van transportsnelheden tussen de verschillende milieumedia gebruik maakte van het thermodynamische begrip fugaciteit, dat de meesten van ons uitsluitend kennen in de betekenis van activiteit van een niet-ideaal gas. Ik beken u dat ik, toen ik Mackay's publicaties 'Finding fugacity feasible'¹⁴, 'Calculating fugacity'¹⁵, en 'Fugacity revisited'¹⁶ las – behalve een eminent geleerde is Mackay ook een absolute meester van de korte, krachtige titel – ik fugaciteit niet in een andere betekenis kende, en niet beter wist dan dat fugaciteit alleen is gedefinieerd voor de gasfase. Dat is niet zo. De activiteit van een niet-ideaal gas is

inderdaad gelijk aan de fugaciteit, maar toen Lewis de functie fugaciteit introduceerde had hij toch zeker ook de interpretatie voor ogen van 'ontsnappingsdruk' van een stof uit de opgeloste fase. Mackay wist dat en gebruikte fugaciteit in die betekenis. En meer dan dat: in de betekenis van ontsnappingsdruk uit welk medium dan ook. Mackay gebruikt fugaciteit zoals ik als student de chemische potentiaal heb leren gebruiken: bij evenwicht tussen twee fasen heeft een stof in beide fasen een even grote fugaciteit. Zijn de fugaciteiten verschillend, dan zal de stof zich willen verplaatsen vanuit de fase met de hoge fugaciteit of ontsnappingsdruk naar die met de lage fugaciteit. Buitengewoon praktisch als je wilt beredeneren of, in geval van een stationaire toestand, een stof uit water vervluchtigt naar de lucht, of juist andersom. Heel aantrekkelijk ook vanuit didactisch oogpunt. Redenerend vanuit fugaciteitsperspectief vervolgt een stof bij stationair transport door een grensvlak tussen twee fasen een continue fugaciteitsgradiënt. In het grensvlak tussen de fasen geldt dezelfde fugaciteit voor de beide fasen. Het fugaciteitsverval is wat een stof drijft. Dat snapt elke student onmiddellijk. Veel moeilijker heeft de student het als hij redeneert vanuit concentratieperspectief. Dan moet hij proberen te begrijpen dat in het fasegrensvlak een concentratiesprong plaatsvindt, dat in het grensvlak de concentratie in de ene fase een andere waarde heeft dan de concentratie in de andere fase, en dat die twee zich verhouden als de evenwichtsconstante tussen de fasen. Die student moet leren, dat de drijvende kracht voor stoftransport wordt gegeven door het verschil tussen de feitelijke concentratie in een fase en de concentratie die er in die fase zou zijn geweest bij evenwicht tussen de fasen. Een gemotiveerde student in de chemische technologie brengt dat tot een goed einde. Maar ik begrijp heel goed dat Mackay, die veel doceerde aan niet-chemici, koos voor de fugaciteitsroute. En hij was daarin heel rigoreus. Hij formuleerde zijn model helemaal in termen van fugaciteit. Pas aan het eind van de rit werkte hij de met zijn fugaciteitsmodel berekende fugaciteiten om naar concentraties, door gebruik van stof- en mediums specifieke fugaciteitscapaciteiten. Raszuivere fugaciteitsmodellen waren en zijn dus de holistische multimedia lotgevallenmodellen van Mackay. En hoe groot mijn bewondering voor het modelconcept ook is, met de benaming fugaciteitsmodel heb ik altijd moeite gehad. Goed bedoeld, maar ongelukkig gekozen. In plaats dat met de naam de essentie wordt uitgedrukt – in mijn ogen is dat dus de holistische eenvoud – komt de nadruk te liggen

op het gebruik van fugaciteit, wat een onbelangrijke bijzaak is. Ongelukkigerwijs zijn de begrippen 'fugaciteitsmodel', 'multimedia model' en ook 'Mackay-model' vaak door elkaar gebruikt, en zijn ze voor niet-ingewijden precies hetzelfde gaan betekenen. Het beeld is ontstaan dat het gedrag van stoffen in een lucht-water-bodem-milieu alleen kan worden gemodelleerd door gebruik te maken van fugaciteit - wat niet zo is, zoals u zojuist hebt gezien. Heel ongelukkig, maar vooral lastig voor mij. De multimediamodellen die wij bij het RIVM maken zijn namelijk geformuleerd in termen van concentraties: concentratiemodellen dus, als het ware. Hoe vaak ik niet heb moeten uitleggen hoe het mogelijk is dat SimpleBox wél een Mackay-model is, en toch géén fugaciteitsmodel! Gelukkig behoort dat misverstand tot het verleden sinds Mackay consequent zijn modellen is gaan benoemen met de term 'massabalansmodel', die wél heel precies aangeeft wat de kern is van het modelconcept.

SimpleBox

In het najaar van 1984, kort na terugkeer van de studiereis die zo lang had geduurd, legden Jodi de Greef en ik de basis voor SimpleBox. Direct even rechtzetten: die eerste versie van SimpleBox – in MultiPlan op Apple IIe, voor wie dit iets zegt – was wél een fugaciteitsmodel. Het was een uitwerking van de publicatie 'Calculating fugacity'¹⁵.



Figuur 1. Schematische weergave het compartimentenmodel SimpleBox. In SimpleBox wordt het milieu gemodelleerd als een geneste set van ruimtelijke schalen, waarin de milieucompartimenten lucht, water, sediment, bodem en vegetatie zijn onderscheiden.

We gaven dit model de naam SimpleSal. Naar Sally Paterson, de sympathieke tweede auteur van de publicatie; de naam van de eerste auteur hadden we al eerder gebruikt in ons eerste model SimpleMac. Het voorvoegsel 'simple' was al een vast gegeven; weerspiegeling van onze overtuiging dat eenvoud kenmerk van het ware is. Er zouden nog vele simpele spreadsheetmodelletjes volgen onderweg naar de volwassenheid: SimpleSpill, SimpleRisk, SimpleWat en wat niet meer. En het stak mijn collega Struijs aan, die zijn model voor het gedrag van stoffen in een afvalwaterzuivering de naam SimpleTreat¹⁷ gaf. Volwassenheid ontstond in 1993, toen het RIVM me het genoegen gunde van een sabbatical tussen de mij zo tot de verbeelding sprekende onderzoekers en modelleurs van het EPA-laboratorium in Athens, Georgia en ik de rust had om het model grondig te herzien en het te documenteren. Sinds die tijd gebruiken we uitsluitend de naam SimpleBox. Versie 1 stamt uit 1993; kort geleden hebben we versie 3 uitgebracht. Mijn verwachting is dat versie 4 zeker zal volgen en dat deze universiteit bij de ontwikkeling daarvan een belangrijke rol zal spelen. Het ontgaat u natuurlijk niet dat de SimpleBox die ik u hier laat zien uitgebreider is dan de unit world modellen waarvan ik de holistische eenvoud roemde. Ons eerste modelletje bestond uit vier of vijf doosjes; SimpleBox versie 3 heeft er veertig. Het is niet langer iets om een student te vragen even in elkaar te steken. Ik ben op mijn beurt ook aangesproken door een criticus die de naam SimpleBox misleidend vond, en 'not so simple box' opperde als alternatief – een alternatief dat ik verworpen heb om esthetische redenen, maar het punt is gemaakt en in mijn hart geef ik de criticus gelijk. Waarom hebben we SimpleBox dan zo laten groeien? Om kleine en grote redenen. Zo was er de kritiek van een commissie van de Gezondheidsraad, die op verzoek van de minister van VROM heeft gekeken naar de formele toepassing van SimpleBox in het milieubeleid. De commissie vond dat de aanwezigheid van planten in het milieu ten onrechte in ons model werd veronachtzaamd. Dus werd een vegetatiecompartiment toegevoegd. Later hebben we op verzoek van de Europese Commissie, die SimpleBox is gaan gebruiken in het beoordelingssysteem EUSES, een kustwatercompartiment toegevoegd. De belangrijkste drijfveer was echter om een oplossing te vinden voor het dilemma dat holistische eenvoud kracht en zwakte tegelijk is. We willen de hele wereld modelleren als een gesloten systeem. Maar de consequentie daarvan, namelijk dat overal op aarde dezelfde concentratie heerst, vinden we te onrealistisch om aan-

vaardbaar te zijn. Het modelleren van kleinere ruimtelijke eenheden lost dit op, maar de consequentie is dat er stof weglekt naar een buitenwereld die we niet modelleren. De oplossing daarvoor is om de wereld op te delen in veel kleine eenheden en die allemaal te modelleren. Dat kan en het wordt ook gedaan.

Atmosferische en hydrologische transportmodellen passen dat concept sinds jaar en dag toe. En sinds de kracht van computersystemen niet meer beperkend is, wordt dit concept ook toegepast in multimediamodellen. Voorbeeld hiervan is een model dat wordt gebruikt door het Meteorologisch Synthesecentrum-Oost in Moskou¹⁸. Fantastisch, maar de charmante eenvoud van het 'unit world'-concept is verloren gegaan. Een duivels dilemma, waarvoor ik een oplossing heb gezocht in nesten. We beschrijven een gebied in de nabijheid van een emissiebron: een lokale ruimtelijke schaal. Wat over de grenzen van dit systeem naar buiten wordt getransporteerd, beschrijven we in een grotere ruimtelijke schaal daaromheen, enzovoort. Dit proces van nesten eindigt met het beschrijven van een buitenste, gesloten schaal. In SimpleBox hebben we op deze manier het noordelijk halfrond afgebeeld als een regionaal systeem dat is genest in een continentaal systeem, dat op zijn beurt weer is genest in een globaal systeem dat bestaat uit drie klimatologisch verschillende zones. Een beetje groter dan het oorspronkelijke 'unit world'-model, maar met behoud van eenvoud; het past nog steeds op een spreadsheet.

Multimedia lotgevallenmodellen: toepassing in de praktijk

SimpleBox is het resultaat van twintig jaar werken. Met onderbrekingen. Veel onderbrekingen. Lange onderbrekingen. En veel werk in de nachtelijke en weekenduren. Heerlijke uren. En wat zo fijn is: ik ben tevreden met het resultaat. Het model doet namelijk wat ik vind dat een model moet doen. Het maakt een vereenvoudigd beeld van de werkelijkheid met behoud van de essentie en verklaart de werkelijkheid. De essentie in de toepassingssfeer van SimpleBox is dat stoffen zich op verschillende manieren gedragen in het milieu, en dat die verschillen het gevolg zijn van verschillen in fysisch-chemische stoffeigenschappen. Ik geef u een paar voorbeelden.

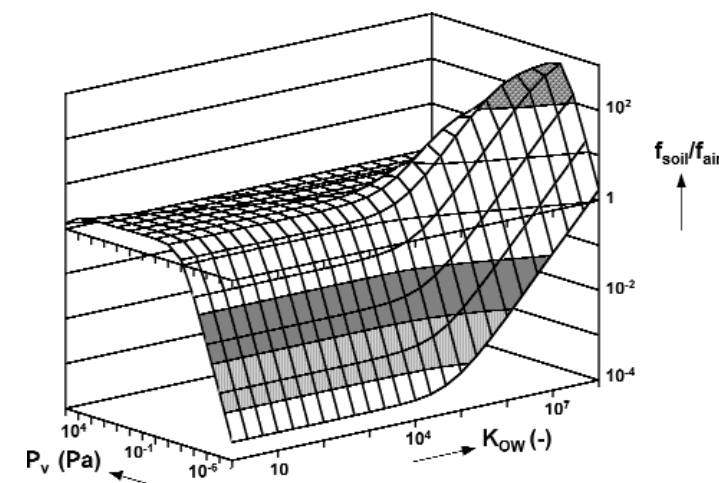
Harmonisatie milieukwaliteitsnormen

Een van de meest voortvarende toepassingen van multimediamodellering in het milieubeleid is de afstemming van milieukwaliteitsnormen voor bodem, water en

lucht. U herinnert zich misschien hoe aanvankelijk het milieubeleid sterk sectoraal was opgezet. Bij het toenmalige ministerie voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne werden zaken aangaande de luchtkwaliteit aangepakt door een sector lucht; bodem en water werden bestreken door andere sectoren. Zo werden er milieukwaliteitsnormen afgeleid voor stoffen in de verschillende compartimenten, iedere norm met een eigen achtergrond, helemaal los van elkaar. Zo waren er ook beleidsafdelingen die ernaar streefden die kwaliteitsnormen los van elkaar te handhaven. Nu heeft het milieu zelf daarover zo zijn eigen gedachten. Moleculen in de lucht communiceren namelijk met hun soortgenoten in water en bodem. Als er in de lucht te veel zijn en er in de bodem ruimte genoeg is, dan verhuizen ze spontaan en als het makkelijk gaat ook massaal. Precies zoals Mackay ons geleerd heeft: stoffen gedragen zich naar hun fugaciteit. Bij een gegeven concentratie in lucht horen, met een zekere marge, gegeven concentraties in water en bodem. Zo kon het voorkomen dat bij een voor de menselijke gezondheid veilige concentratie in lucht een concentratie in water hoort die helemaal niet veilig is voor planten en dieren in dat compartiment. Beleidsmakers bij de afdeling stoffen op het departement voor Milieubeheer realiseerden zich dat en begonnen rond 1990 aan het ambitieuze programma voor Integrale Normstelling voor Stoffen, het INS. Integraal onder andere in de zin dat de normen voor lucht, water en bodem niet met elkaar in conflict zouden zijn. Overal veilig lage concentraties, en in onderlinge verhoudingen die ook echt in het milieu kunnen voorkomen. Metingen van concentraties in alle compartimenten waren voor maar weinig stoffen beschikbaar. Multimediamodelering moest antwoord geven op de vraag welke concentratieverhoudingen realistisch zijn. Dat is voortvarend; petje af voor de Nederlandse beleidsmakers. Als je voldoende begrijpt hoe stofstromen lopen en hoe groot ze zijn, maak je daarvan gebruik in het beleid. Maar daaraan ging natuurlijk wel het een en ander vooraf. Hoe goed laten concentratieverhoudingen zich beschrijven met multimediamodelen? Welke onzekerheidsmarges moeten we in acht nemen? Is het model voor dit doel gevalideerd? Is dat voor alle stoffen hetzelfde? Maakt het verschil naar welk compartiment de stof wordt geëmitteerd? Hangt het af van de stoffeigenschappen? Ik ga nu alleen kort in op het laatste. Ik gebruik een resultaat uit de modelstudie die ik een jaar of tien geleden heb gedaan tijdens mijn sabbatical in Athens, Georgia¹⁹. We kijken naar stoffen die naar lucht worden geëmitteerd. We berekenen met een

multimediamodel de concentratieverhoudingen tussen lucht en bodem, ervan uitgaande dat alle omstandigheden, inclusief de emissies, onveranderlijk zijn in de tijd. Dan worden ook na enige tijd de concentraties en dus de concentratieverhoudingen constant. Zo krijgen verschillende stoffen verschillende lucht-bodemconcentratieverhoudingen. Stationair, dus constant in de tijd. Dat is iets anders dan evenwicht. Evenwicht krijg je als een vaste hoeveelheid van de stof zich verdeelt over twee fasen. Voor lucht en water krijg je dan een concentratieverhouding die bekend staat als de constante van Henry. Die voor water en bodem hebben we eerder vanmiddag gezien. Voor lucht en bodem bestaat er ook een. De stationaire concentratieverhouding die met het multimediamodel wordt berekend, is alleen maar gelijk aan die evenwichtsverhouding als de uitwisseling tussen de compartimenten zo snel is dat andere processen geen merkbare invloed hebben op de concentraties. Voor het afstemmen van normen zou het reuze handig zijn als er evenwicht zou heersen. De evenwichtsconstanten zijn immers afgeleide eigenschappen, die zich makkelijk laten schatten uit de fysisch-chemische stoffeigenschappen. Wij vroegen ons af hoe groot de afwijkingen van de evenwichtstoestand onder normale, stationaire, milieu-omstandigheden zouden kunnen zijn. Anders gezegd: hoe groot de fugaciteitsverschillen tussen de compartimenten zijn.

Figuur 2.
Berekende stationaire fugaciteitsverhoudingen bodem-lucht in geval van emissie naar lucht. Voor veel stoffen heerst evenwicht tussen bodem en lucht, maar grote afwijkingen van de evenwichtstoestand treden op bij stoffen met een lage dampdruk.



We hebben dat berekend voor een grote reeks van hypothetische stoffen, waarvan de relevante eigenschappen systematisch zijn gevarieerd. De lucht-bodem-water-verdeling van stoffen wordt bepaald door drie evenwichtsconstanten, waarvan we er twee vrij kunnen kiezen. Die evenwichtsconstanten worden op hun beurt weer bepaald door twee stofeigenschappen, bijvoorbeeld de dampdruk en de octanol-waterpartitiecoëfficiënt. Door die stofeigenschappen systematisch te variëren, bewegen we ons dus als het ware door de chemische stoffenruimte. Ons berekeningsresultaat is daardoor representatief voor alle denkbare stoffen. Merk op dat we deze berekening kunnen doen en de resultaten ervan zo kunnen plotten, dankzij het feit dat we alle processnelheden in het model hebben geformuleerd als expliciete functies van de stofeigenschappen. Naar mijn gevoel schuilt hier de echte kracht van dit modeltype. En wat blijkt?

Voor een groot deel van het stoffendomein geldt dat bij emissie naar lucht de concentratie in de bodem vrijwel in evenwicht is met die in de lucht en dat dan de fugaciteiten gelijk zijn (fugaciteitsverhouding gelijk aan één). Zoals we hoopten, prachtig. Maar helaas geldt dat niet voor het hele domein. Bijvoorbeeld niet voor de stoffen die een lage octanol-waterpartitiecoëfficiënt én een lage dampdruk hebben. Organische zuren en basen, die in water als anion of kation voorkomen; tamelijk wat bestrijdingsmiddelen vallen in deze categorie. Zulke stoffen houden zich bij voorkeur op in waterig milieu; ze mijden de lucht en in de bodem vinden we ze in het poriewater. Voor deze stoffen ligt het evenwicht extreem aan de kant van bodem. Bovendien spoelen ze betrekkelijk snel uit de bodem weg. Het proces van atmosferische depositie is snel, maar niet snel genoeg om de concentratie in bodem op evenwichtsniveau met de lucht te krijgen. Opmerkelijker is dat er ook stoffen zijn waarvoor de concentratie in bodem hóger wordt dan de evenwichtsconcentratie: stoffen met een tamelijk lage dampdruk en een heel hoge octanol-waterpartitiecoëfficiënt – de ouderwetse persistente hydrofobe stoffen, die we vooral aantreffen in de vaste fase van bodems en sedimenten. Voor zulke stoffen wordt bij emissie naar lucht de fugaciteit in bodem hoger dan de fugaciteit in lucht. Hoe kan dat? Er is transport vanuit de atmosfeer naar het aardoppervlak. Gaat dat transport dan tegen de fugaciteitsgradiënt in? Streeft ons model dan niet naar egalisatie van fugaciteit? Is het model dan fout? Nee, en daarom laat ik het u zien. Deze situatie is eigenlijk veel gecompliceerder dan hij zich laat aanzien. We model-

leren maar een paar transport- en omzettingsprocessen. Toch is het resultaat niet zomaar te begrijpen. Dat vraagt nader puzzelwerk. Het illustreert hoe ingewikkeld zelfs de vereenvoudigde werkelijkheid kan zijn. Of misschien moet ik zeggen: hoe beperkt ons analytische vermogen is. Nee, het model is niet fout. In essentie is de verklaring dat voor stoffen met een hoge octanol-waterpartitiecoëfficiënt het evenwicht veel minder aan de kant van bodem ligt, maar vooral dat deze stoffen maar heel langzaam uit de bodem worden verwijderd en dat de concentraties daardoor hoog kunnen oplopen. Stoffen met deze eigenschappen worden door droge en natte neerslag altijd in de richting van het aardoppervlak getransporteerd, ongeacht de fugaciteitsgradiënt. Een onverwacht resultaat, dat aanvankelijk werd verdacht onjuist te zijn, maar dat na enig puzzelen werd begrepen: een aha-beleving van het zuiverste water.

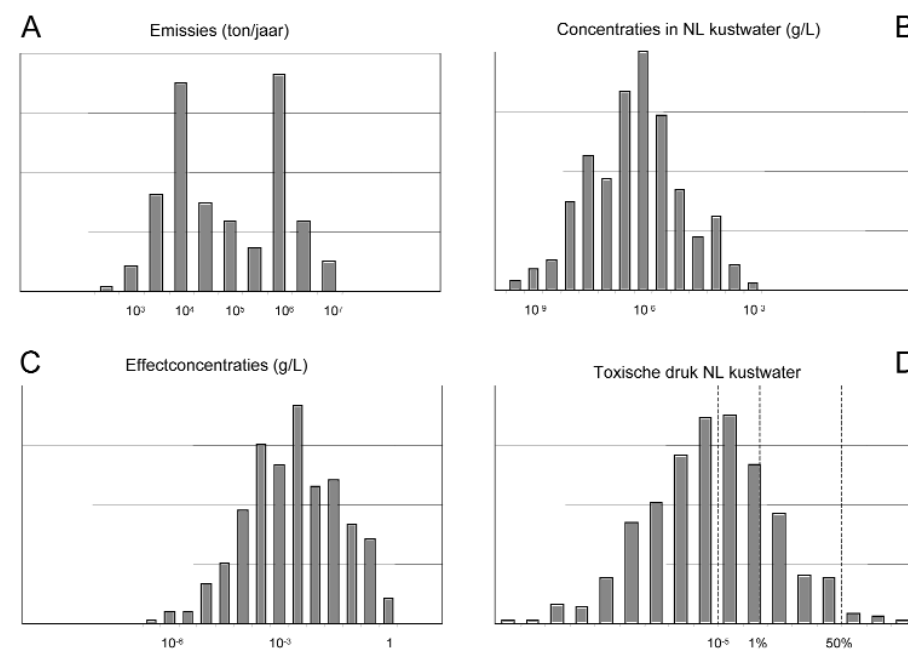
Jazeker, het model doet wat het moet doen. Het is logisch, het vereenvoudigt, het verklaart, en het voorspelt.

Prioritering bestaande stoffen

Een ander voorbeeld is van recenter datum, maar net als het vorige het resultaat van een sabbatsverlof, deze maal in Osnabrück²⁰. Voor een goed begrip zeg ik u dat sinds enige tijd in milieubeleidskringen een grote bezorgdheid heerst over het enorme aantal chemische stoffen dat we momenteel in gebruik hebben. Op EU-niveau wordt intensief gewerkt aan risicoreductie, maar dat proces vordert langzaam. Voor een stuk of honderd stoffen zijn de risico's voor gezondheid en ecosystemen in kaart gebracht en worden waar nodig maatregelen genomen om de risico's te beperken. Hopelijk vertegenwoordigen die eerste honderd onderzochte stoffen het grootste deel van het risico, maar geen mens durft daarop te vertrouwen. Er zijn immers nog zoveel stoffen die we niet hebben kunnen onderzoeken. Zouden de risico's van die stoffen samen acceptabel klein zijn? Hoe valt dat te weten als er geen metingen zijn? Deze situatie doet ons natuurlijk sterk denken aan de situatie met nieuwe stoffen, waarover we weinig meer weten dan welke hoeveelheid ervan wordt geproduceerd of geïmporteerd, en wat de fysisch-chemische basiseigenschappen zijn. Typisch iets dus om aan te pakken met multimediamodellering.

Ik vatte het plan op om voor alle stoffen waarvoor de voldoende informatie beschikbaar was te berekenen hoe groot bij benadering de concentraties in het milieu

zouden moeten zijn, en hoe groot bij die concentraties de toxische druk van die stoffen op het milieu is. Het chemische stoffenbureau van de Europese Commissie bleek voor 429 stoffen over voldoende betrouwbare gegevens te beschikken. Voor de overige stoffen ontbreekt zelfs de basisinformatie. Deze 429 stoffen heb ik geSimpleBoxt, om het kort uit te drukken. Ik heb emissies geschat op basis van de gerapporteerde productievolumina binnen de hele EU, door gebruik te maken van de technische richtlijnen die daarvoor binnen de EU gelden. En met die emissies heb ik met SimpleBox concentratieniveaus in lucht, water en bodem op de verschillende ruimtelijke schalen geschat. Ook heb ik de bij die concentraties behorende toxische drukken uitgerekend aan de hand van ons bekende toxiciteitsgegevens. Het resultaat is veelbetekenend. Het gaat hier om stoffen, die in grote hoeveelheden worden gemaakt en gebruikt: 100.000 ton per jaar is gewoon. De emissies ervan zijn navenant. Volgens de gangbare schattingsmethoden vind een niet onaanzienlijk deel hiervan vroeger of later zijn weg naar het milieu – tien procent of meer is niet ongewoon. Concentraties zijn in SimpleBox recht evenredig met emissies, waarbij de evenredigheidsconstante een functie is van de stoffeigenschappen. Volgens SimpleBox komen voor deze stoffen met deze emissies de concentraties in het Nederlandse kustwater typisch op het microgram per liter niveau uit, met een spreiding die tamelijk wat groter is dan de spreiding in productievolumina en emissies. Dat is het gevolg van de onderlinge verschillen in milieugedrag, die we met deze oefening zichtbaar wilden maken. Interessant om te zien, is dat de concentraties waarbij de effecten van deze stoffen op het plantaardige en dierlijke leven in water zichtbaar worden drie à vier orden van grootte hoger liggen. Dat lijkt redelijk veilig. Maar let op: de spreidingen in concentraties en toxiciteiten belopen beide meer dan vier orden van grootte, zodat de verdelingen overlappen. Er zijn stoffen waarvan de concentraties in het gevaarlijke gebied liggen. Hoe gevaarlijk? Dat blijkt als we voor alle stoffen de toxische druk berekenen die bij de gevonden combinatie van concentratie en toxiciteit hoort.



Figuur 3. Risicoschatting voor 429 stoffen met een hoog productievolume in de EU. Emissies (A), concentraties in water (B), toxische effectconcentraties (C) en toxische drukken voor ecosystemen (D). Een groot deel van het effect (95%) wordt veroorzaakt door een klein deel (5%) van de stoffen.

Ik volsta met te vermelden dat de toxische druk een dimensieloze fractie is van de soorten die mogelijk schade lijden. We zien een paar dingen. Eerst het goede nieuws: de toxische drukken zijn laag: typisch op het niveau dat van elke 100.000 soorten er één schade ondervindt van de aanwezigheid van de stof. Dat is een getal waarvan we de betekenis nauwelijks kunnen interpreteren: hoeveel soorten zitten er eigenlijk in een ecosysteem? Maar de spreiding in de toxische drukken is enorm: meer dan vijftien orden van grootte. En daaruit volgt dan direct het slechte nieuws. De toxische drukken zijn voor vrijwel alle stoffen laag, maar er zijn stoffen waar-

van wél een grote toxische druk uitgaat. In deze berekening verschijnen er zelfs een paar – rechts van de rechter stippellijn – waarvan we zichtbaar effect verwachten voor meer dan de helft van de soorten. Laten we hopen dat dat schattingsfouten zullen blijken te zijn. Wat makkelijk kan, want het zijn ruwe schattingen met enorme onzekerheden. Terug naar het goede nieuws. Van de grote meerderheid van de stoffen heeft het milieu niets te vrezen. Het gedeelte van de soorten dat schade kan ondervinden is dermate klein dat volgens de gangbare opvattingen het risico voor schade aan ecosystemen verwaarloosbaar mag worden geacht. Maar of de schade aan ecosystemen klein of groot is, de conclusie lijkt onomstotelijk dat er op de lijsten van de EU maar een handjevol stoffen staat die er echt toe doen. In dit voorbeeld wordt 95 procent van het totale effect veroorzaakt door maar 5 procent van de stoffen. Dat wil zeggen: 5 procent van de nu onderzochte 429 stoffen, waarvan we reden hebben om te vermoeden dat ze tot de ergsten behoren. Het ligt in de rede te vermoeden dat de stoffen die we niet hebben bekeken gemiddeld een lagere toxische druk zullen hebben.

De profetie van de modelberekeningen is vérstrekkend. In plaats van te proberen om over zo veel mogelijk stoffen iets te zeggen, lijkt onze energie beter besteed aan een speurtocht naar de 5 procent stoffen die er het meest toe doen. Een speurtocht waarbij de multimediamodellering als recherchemiddel zou kunnen dienen. Opnieuw een inzicht van grote eenvoud dat pas ontstond nadat de modelberekeningen waren uitgevoerd.

Leeropdracht milieukwaliteit

Het werken met modellen fascineert mij dus. Is dat reden om er aandacht aan te besteden? Ik vind van wel. Ikzelf heb niet meer reden nodig. Ik ga proberen de vonk te laten overslaan. Ik ga dat doen op beide academische fronten: het onderwijs en het onderzoek.

Onderwijs

Het onderwijs dat op mijn vakgebied binnen de opleiding Milieu-Natuurwetenschap wordt verzorgd door Ad Ragas en Mark Huijbregts is van hoge kwaliteit en toegepast op aspecten die er voor het veld waarin ik werk toe doen. Hier worden mensen opgeleid tot kritisch vragende, toepassingsgerichte denkers, die prima hun weg

vinden in de maatschappij, bijvoorbeeld als milieubeleidsondersteuner. Binnen deze opleiding wordt ruim aandacht besteed aan het werken met modellen. Het multimediamodellieren behoort hier tot de standaardstof. Aan geen andere universiteit in Nederland wordt zo gedegen aandacht besteed aan mijn vak als aan deze universiteit. Met veel genoegen zal ik de bijdragen die ik al jaren lever in de vorm van gastcolleges omzetten naar een structurele vorm, en waar gewenst zal ik mijn bijdragen uitbreiden. Wellicht tot een module milieumodellering op master- of promovendi-niveau. We gaan zien hoe de omstandigheden, waarvan de belangstelling van studenten voor dit vak deel uitmaakt, zich ontwikkelen. Het is mijn stellige indruk dat er in Nederland een blijvende vraag is naar professionals, beleidsmedewerkers bijvoorbeeld, die goed vertrouwd zijn met het werken met milieumodellen. Ik vertrouw erop dat als afspiegeling daarvan een blijvende vraag van studenten naar opleiding in deze richting zal blijven bestaan.

Onderzoek

Goed wetenschappelijk onderwijs is ingebed in een infrastructuur van goed wetenschappelijk onderzoek. Met welk onderzoek op ons vakgebied kunnen we bijdragen aan de voortgang van de wetenschap, zodanig dat het optimaal mogelijkheden voor opleiding biedt aan studenten en promovendi? Ik wil me op twee terreinen begeven: op het terrein van het technisch-wetenschappelijk ontwikkelings- en onderhoudswerkwerk aan modellen, en op het terrein van het kritisch toepassen en valideren van modellen. Terreinen overigens die naar mijn eigen ervaring als vloeiend in elkaar over lopen.

Het technisch-wetenschappelijke werk aan modellen vormt naar mijn mening de basis van alle toepassing ervan. Geen onderzoeker of beleidsmedewerker kan met voldoende verstand een model toepassen als hij of zij niet de theorie waaruit een model bestaat doorgrondt. Dat moet goed zitten. Dat moet een student of onderzoeker in opleiding zich eigen maken. En daarbij moet hij of zij niet aarzelen onder de motorkap te duiken. Sleutelen aan de modelvergelijkingen is in mijn ogen een voorwaarde voor de opleiding tot modeltoepasser. Ik heb daar in het verleden anders over gedacht. Ik bestuur immers ook een auto zonder verstand te hebben van verbrandingsmotoren. Ik heb gedacht dat we onze modellen zo kunnen maken dat een onwetende er nuttig gebruik van kan maken. Ik sluit die mogelijkheid nog steeds

niet uit, maar ik heb daarvan nog nooit een voorbeeld gezien. Nee, in een onderzoekinfrastructuur waarin modeltoepassers worden opgeleid, wordt aan modellen gesleuteld.

En daarvoor zijn nuttige aanknopingspunten te over. In het up-to-date houden en verbeteren van de procesbeschrijvingen in modellen bijvoorbeeld. Voortdurend worden in de literatuur nieuwe inzichten gepubliceerd op dit gebied. McLachlan en Wania²¹ in Warnemünde en Toronto hebben laten zien hoe groot voor hydrofobe stoffen de invloed kan zijn van het in rekening brengen van verstoring van de bodem door bijvoorbeeld bioturbatie op de uitwisselingssnelheid tussen bodem en atmosfeer. En Hertwich en McKone^{22,23} in Berkeley hebben laten zien hoezeer we de plank kunnen misslaan met de gebruikelijke modellen die transport en omzetting beschouwen als in tijd en ruimte gemiddelde processen. Zo zijn er meer. Prima onderwerpen voor onderzoeksstages in de masterfase van onze opleiding. Onderwerpen ook waarvoor wellicht belangstelling bestaat buiten de universiteit, bij bedrijven en instellingen die belang hebben bij het in stand houden van een technisch-wetenschappelijke onderzoeksinfrastructuur waarin bruikbare werknemers worden opgeleid. Onderwerpen ook die kunnen leiden tot verbeteringen in de modellen die momenteel door bedrijven en instellingen worden gebruikt, en waarvan ze misschien opwaarderend onderhoud door onze universiteit zouden willen laten verzorgen.

Maar mijn onderzoeksambitie gaat verder dan dat. U heeft gemerkt hoe het ruimtedilemma mij raakt. Ik zie als wetenschappelijke uitdaging om een naar eenvoud en gebruiksnut geoptimaliseerde ruimtelijke differentiatie te vinden in de multimedia lotgevallenmodellering. Ik heb u laten zien hoe ikzelf de oplossing heb gezocht in het nesten van ruimtelijke schalen. Anne Hollander bij onze afdeling Milieukunde onderzoekt hoe ruimtelijke differentiatie kan bijdragen aan een betere beschrijving van het gedrag van stoffen op de ruimtelijke schaal van rivierstroomgebieden. Ik hoop deze twee benaderingen te combineren tot een geneste SimpleBox waarin de binnenste schaal een stroomgebied afbeeldt met een door Anne beredeneerde ruimtelijke differentiatie.

Op het gebied van toepassing en validering van modellen zie ik ons vooral werken aan vraagstellingen die direct of indirect voortkomen uit het Europese stoffenbeleid. De Europese Commissie heeft onlangs het nieuwe REACH-systeem voor Registratie,

Evaluation and Authorization of Chemicals gelanceerd. Deze nieuwe regelgeving, die in de plaats komt van een veelheid aan oude EU-richtlijnen, moet leiden tot het onder controle brengen van de milieu- en gezondheidsrisico's van de enorme aantallen chemische stoffen die momenteel in gebruik zijn in de EU. Om te voorkomen dat dit leidt tot veel kostbaar laboratoriumonderzoek en ongewenste dierproeven, bepleit de commissie onder andere verdergaand gebruik van computermodellen in de risicobeoordelingen. Ook wordt binnen REACH de rol van de verantwoordelijke industrie groter. Hoewel nog niet precies is te voorzien tot welke soorten vragen invoering van REACH zal leiden, komt het me voor dat de vraag naar model-gebaseerde analyses van de risico's van stoffen voor menselijke gezondheid en ecosystemen zal toenemen. Voor een deel zullen die vragen gesteld worden door de Europese Commissie. Bijvoorbeeld in het zesde kaderprogramma, dat momenteel in uitvoering is. Maar de nieuwe vragen die uit REACH voortkomen, zullen vooral op de borden komen te liggen van chemische bedrijven en hun brancheverenigingen. Vragen die vast en zeker zullen kunnen worden aangevat met de expertise die wij in huis hebben. Ik zie voor me dat we onze expertise in het kwantificeren van toxische druk inzetten in een speurtocht naar die paar stoffen die er echt toe doen. En naar manieren om met voldoende zekerheid te kunnen besluiten geen verdere aandacht aan een stof te besteden omdat de kans klein is dat hij ertoe doet. Samen met industriële partners. En als het even kan ook samen met de overheid.

Samenwerking

Nederland staat internationaal goed aangeschreven als het gaat om milieumodellering. Vanwege de vele goede onderzoeksresultaten die zijn en worden geleverd door universiteiten en onderzoeksinstellingen, zoals TNO, Alterra en het RIVM -op veel verschillende plaatsen, in doorgaans kleine groepjes. Het goede is versnipperd. De goede naam van Nederland is verdeeld over zo veel kleine groepjes dat uiteindelijk niemand profiteert van die goede naam. Dat vraagt om samenwerking. Ik gebruik deze gelegenheid om u de oprichting aan te kondigen van het Netherlands Center for Environmental Modeling. Een samenwerkingsconvenant van universitaire onderzoeksgroepen met expertise op het gebied van de modellering van het milieugedrag en de effecten van toxische stoffen voor mensen en ecosystemen. Met als hoofddoel gezamenlijk naar buiten te treden bij het aanbieden van onderzoeks-

diensten aan potentiële afnemers op de internationale markt. Een nevendoeel dat naar ik hoop zal uitgroeien tot een hoofdzaak is samenwerking tussen deze universitaire partners in onderzoek. Het centrum voor milieumodellering start met twee partners: de theoretische biologie-groep van Kooijman aan de Vrije Universiteit, en de afdeling Milieukunde van deze universiteit. De expertiseprofielen van deze beide groepen zijn complementair. Onze eigen groep biedt vooral expertise op milieuchemisch gebied. We zijn sterk in het modelleren van de verspreiding van toxische stoffen in het milieu; onze expertise op het gebied van effecten van toxische stoffen is secundair. Bij de groep van Kooijman is dat andersom. De beide groepen zijn sterk modelmatig gericht, met een voorkeur voor een mechanistische, natuurwetenschappelijke benadering, en met een lange historie in de modellering van toxische stoffen. Samen denken we een aanzienlijk deel van de Nederlandse expertise op dit deelgebied te vertegenwoordigen. We durven het aan om samen het Netherlands Center for Environmental Modeling te starten. We hopen natuurlijk dat andere, gelijkgestemde onderzoeksgroepen met een gelijke of aanvullende expertise zich bij ons aansluiten als zich daartoe een onderzoeksgelegenheid aandient. Onze ambitie is immers om de gezamenlijke Nederlandse expertise op het gebied van milieumodellering te bundelen. Het Netherlands Center for Environmental Modeling ziet uit naar een vruchtbare samenwerking met bedrijven en onderzoeksinstellingen.

Dankwoord

Mijnheer de rector, dames en heren, voor mij persoonlijk is dit een grote gebeurtenis. Vanaf het eerste moment dat er sprake was van een bijzondere leerstoel Milieu-kwaliteit heb ik geweten dat dit is wat ik altijd heb gewild. Waar ik eerder dingen op zijn beloop liet, niet wilde of durfde te kiezen, heb ik deze kans met beide handen aangegrepen. Ik ben geweldig blij met deze benoeming, ontzettend trots op deze aanstelling. Ik dank u allen dat u wilt delen in mijn blijdschap en trots. Ik dank het bestuur van de Stichting Nijmeegs Universiteitsfonds voor het instellen van deze bijzondere leerstoel, en ik dank het bestuur van de Faculteit der Natuurwetenschappen, Wiskunde en Informatica voor het vertrouwen in mij. Ik dank in het bijzonder de twee mensen die de SNUF en de Faculteit op deze voor mij zo goede gedachte hebben gebracht: Mark Huijbregts en Piet Nienhuis. Ik dank ook de leiding

van het RIVM voor het scheppen van de voorwaarden. Met name dank ik Hans Canton en Gerrit de Mik, die mij deze functie zozeer toevertrouwden dat zij twintig procent van mijn tijd vrijmaakten voor dit werk in Nijmegen, zonder daaraan één enkele voorwaarde te verbinden.

Dit is voor mij ook een moment om in dank terug te zien op wat verschillende mensen in de loop van mijn leven voor me hebben betekend. Mijn ouders, die beide overleden zijn. Ik draag hun genen en ik gedraag me naar hun beeld. Ik dank mijn ouders voor wie ze waren, voor hoe ze me hebben voorgeleefd. Ik weet hoe trots ze op me zouden zijn geweest. Mijn broers en zusters dank ik voor de kritische kameraadschap waarmee ze me altijd hebben omringd en die me heeft gescherpt.

Heel veel dank ik aan mijn leermeesters in de wetenschap: Pieter Schenck, die ik nooit heb getutoyeerd omdat ik dat bij mijn vader niet zo gewend was en Jan de Leeuw, bij wie ik dat wél deed, maar die ik altijd even hoog heb geacht. Mijn herinnering aan mijn wetenschappelijke jongensjaren in Delft en Berkeley is helder en emotioneel geladen. Pieter, Jan: ik dank jullie voor je inspirerende rol daarin. In jullie dank ik ook alle andere leermeesters en collega's bij en met wie ik in de loop van mijn carrière heb gewerkt, en van wie velen vrienden voor me zijn geweest. Met hen heb ik het vak geleerd. Aan hen heb ik me gespiegeld. Zonder anderen tekort te willen doen noem ik hier slechts één naam: die van Jodi de Greef.

Nu ik hier sta, en heb gekregen wat ik altijd heb gewild, weet ik hoezeer dat is dankzij degenen die mij het naast zijn: Dineke en de jongens. Dineke, jij hebt me altijd je onvoorwaardelijke steun gegeven in alles wat ik heb gekozen te doen. Je hebt daarbij je eigen belangen ondergeschikt gemaakt aan die van ons gezin en die van mij. Je hebt me door mijn dip heen geholpen toen mijn ambitie me over de rand had gedreven en het licht even bij me uitging – dat ondanks de problemen met je eigen gezondheid. Dat is groot. Dank je dat je naast me wilt staan en mijn maatje wilt zijn.

Ik feliciteer mezelf, de KUN en het RIVM met deze drievoudige winsituatie.

Ik heb gezegd.

Referenties

- 1 Lassiter, R.R. 'Testing models of the fate of chemicals in aquatic environments', in: K.L. Dickson, A.W. Maki, J. Cairns Jr. (eds.), *Modeling the fate of chemicals in the aquatic environment*, pp 287-301, Ann Arbor Science, 1982.
- 2 Sabljic, A., Güsten, H., Verhaar, H. en Hermens, J. 'QSAR modelling of soil sorption. Improvements and systematics of log K_{OC} vs. log K_{OW} correlations'. *Chemosphere* 31, 4489-4514, 1995
- 3 Karickhoff, SW. 'Semiempirical estimation of sorption of hydrofobic pollutants on natural sediments and soils'. *Chemosphere* 10, 833-849, 1981.
- 4 European Commission. *EUSES, the European Union System for the Evaluation of Substances*. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands. Available from European Chemicals Bureau (EC/DGX1). Ispra, Italy, 1996
- 5 '... all models are wrong; the practical question is how wrong do they have to be to not be useful'. Box, G. en Draper, N. *Empirical Model Building and Response Surfaces*, John Wiley, p. 74, 1987.
- 6 Van de Meent, D. *SimpleBox, a generic multimedia fate evaluation model*. Report no. 672720001, RIVM, Bilthoven, 1993.
- 7 Brandes, L.J., Den Hollander, H. en Van de Meent, D. *SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals*. Report no. 719101029, RIVM, Bilthoven, 1996.
- 8 Den Hollander H.A., Van Eijkeren J. en Van de Meent D. *SimpleBox 3.0: multimedia mass balance model for evaluating the fate of chemical in the environment*. Report no. 601200 003, RIVM, Bilthoven, 2004.
- 9 Carson, R. *Silent Spring*. Penguin, 1962
- 10 Burns, LA. *Exposure Analysis Modeling System (EXAM II): User's guide for version 2.97.5*. National Exposure Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA 30605, 1997.
- 11 Carsel, R.F., Imhoff, J.C., Hummel, P.R., Cheplick, J.M. en Donigian Jr, A.S. *PRZM-3, A model for predicting pesticide and nitrogen fate in crop root and unsaturated soil zones: Users manual for release 3.0*. National Exposure Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA 30605, 1997.
- 12 Neely, W.B. *Chemicals in the Environment*. Marcel Dekker, 1980.
- 13 Neely, W.B. en Mackay, D. 'Evaluative model for estimating environmental fate', in: K.L. Dickson, A.W. Maki en J. Cairns (eds.), *Modeling the fate of chemicals in the aquatic environment*. Ann Arbor Science Publishers, pp 127, 1982.
- 14 Mackay, D. 'Finding fugacity feasible'. *Environ. Sci. Technol.* 13, 1218, 1979.
- 15 Mackay, D. en Paterson S. 'Calculating fugacity'. *Environ. Sci. Technol.* 15, 1006-1014,, 1981.
- 16 Mackay, D. 1982.'Fugacity revisited'. *Environ. Sci. Technol.* 16, 654A-660A
- 17 Struijs, J., Stoltenkamp, J., en Van de Meent, D. 'SimpleTreat, a box model of the behavior of micropollutants during waste water treatment'. *Water Research* 25, 891-900, 1991.
- 18 Malanichev, A., Shatalov, V., Vulykh, N. en Strukov, B. *Modelling of POP Hemispheric Transport*, MSC-E Technical Report 8/2002.
- 19 Van de Meent, D. en De Bruijn J. 'A modeling procedure to evaluate the coherence of independently derived environmental quality objectives for air, water and soil'. *Environ. Toxicol. Chem.* 14, 177-186, 1995.
- 20 Van de Meent D., Den Hollander H.A., De Bruijn J. en Hansen B. 'Calculating cumulative toxic pressure of chemicals with a nested local/regional/global multimedia fate- and effects model'. In voorbereiding.
- 21 McLachlan, M.S., Chub, G. en Wania F. 'The influence of vertical sorbed phase transport on the fate of organic chemicals in surface soils'. *Environ. Sci. Technol.* 36, 4860-4867, 2002.
- 22 Hertwich, E. en McKone T.E. 'Pollutant-specific scale of multimedia models and its implications for the potential dose'. *Environ. Sci. Technol.* 35, 142-148, 2001.
- 23 Hertwich E. 'Intermittent Rainfall in Dynamic Multimedia Fate Modeling'. *Environ. Sci. Technol.* 35, 936-940, 2001

